

Senso*Logic*



Die S*L*-Produktfamilie

Eine umfassende Softwareplattform für die Praxis der chemometrischen Spektroskopie

Intelligente Spektroskopie...

Spektroskopie mit chemometrischer Auswertung, vor ca. 40 Jahren mit der Nahinfrarot-Spektroskopie (NIRS) entstanden, ist heute eine ausgereifte Technologie, mit der konventionelle, meist chemische Analysenmethoden durch viel einfachere Messungen mit optischen Geräten ersetzt werden können. Ermöglicht wird dies durch Modellierung des Zusammenhangs zwischen Spektren und Analysendaten mit bewährten mathematisch-statistischen Methoden.

Auf diese Weise können zerstörungsfrei, sauber und schnell Eigenschaften von unbekanntem Proben bestimmt werden. Mit anderen Worten: in der täglichen Routineanalytik werden damit Zeit, Ressourcen und vor allem Kosten eingespart.

... mit *SZ*-Softwareprodukten

Durch die Verbindung mehrerer sorgfältig abgestimmter *SZ*-Anwendungsmodulen mit einer einheitlichen Projekt-Datenbankstruktur können die Anforderungen vielfältiger Einsatzgebiete erfüllt werden.

Die *SZ*-Module sind einsetzbar zum Beispiel:

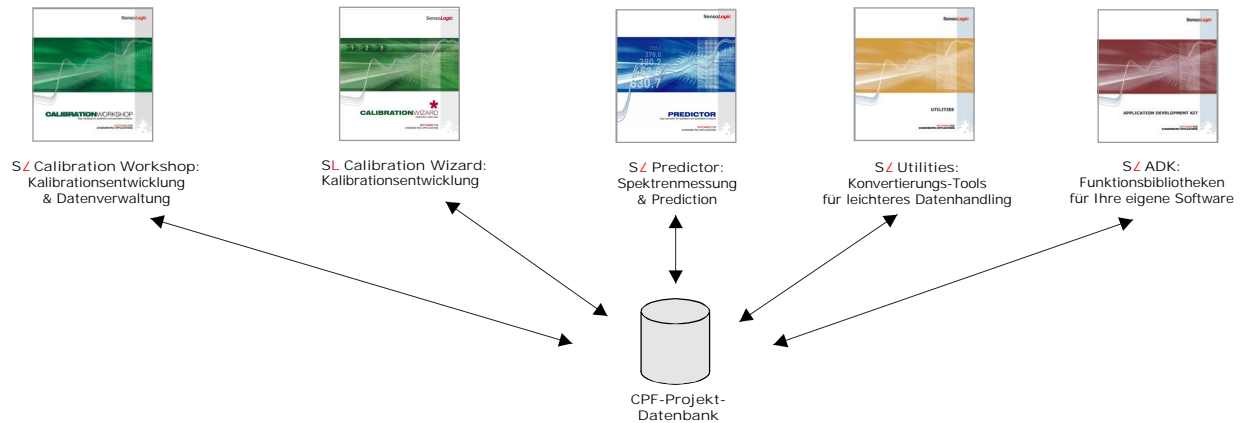
- zur Analyse von Getreideproben in der Landwirtschaft;
- zur Untersuchung von Fleischprodukten in der Lebensmittelproduktion;
- zur Bestimmung der Säurezahl von Substanzen in der chemischen Industrie oder der Oktanzahl von Benzenen in der Petrochemie;
- zur Identitäts- oder Konformitätsprüfung von den Rohstoffen im Wareneingang über Zwischenstufen bis zum fertigen Produkt.

Der gesamte Arbeitsablauf - von der Erfassung der Spektren und Referenz-Analysenwerte, der anschließenden Erstellung einzelner Kalibrationsmodelle und kompletter Applikationen bis hin zu ihrer Anwendung im Messbetrieb - wird praxisgerecht unterstützt.

Dies geschieht unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Arbeitsplatzanforderungen und weitgehend unabhängig von dem jeweils eingesetzten Gerätetyp.

Aufgrund ihrer durchdachten Modularisierung eignet sich die *SZ*-Produktfamilie gut für kunden- oder anwendungsspezifische Anpassungen. Also überall dort, wo besondere Anforderungen erfüllt werden müssen, jedoch das Erstellen einer reinen Individualsoftware wirtschaftlich nicht gerechtfertigt ist.

Folgende S/L - Module sind erhältlich:



S/L Calibration Workshop:
für die spezifische Entwicklung und Validierung von spektroskopischen Analysemethoden zur Bestimmung qualitativer oder quantitativer Probeneigenschaften und für das Management der Projekt-Datenbanken

S/L Calibration Wizard:
für die besonders schnelle und einfache Erstellung quantitativer Methoden; durch schrittweise Bedienung, Parallelbearbeitung mehrerer Kalibrationsmodelle und weitreichende Automatisierungsmöglichkeiten für Neueinsteiger und Experten die ideale Ergänzung zum S/L Calibration Workshop

S/L Predictor:
für den vielseitigen Routineeinsatz im analytischen Messbetrieb at-line oder im Labor zur Messdaten-Erfassung und -Auswertung mit qualitativen oder quantitativen Modellen

S/L Application Development Kit
zur Verwendung der fertigen Analysemethoden und anderer Inhalte der S/L-Projekt-Datenbanken in Programmen von Drittanbietern oder Anwendern

S/L Utilities:
eine Sammlung nützlicher Zusatzprogramme für die Kalibrationsvorbereitung und Datenverwaltung/-konvertierung

S/L Calibration Workshop 2.1

Modellerstellung für quantitative und qualitative Analyse und Datenbank-Management



Inhalt:
Software S/L
Calibration Workshop
Sprache: Englisch
1 CD-ROM
1 Software-Handbuch
(Englisch)

PC System-Anforderungen:
Intel- oder AMD-Prozessor
(empfohlen > 1 GHz)
mindestens 256 MB RAM
mindestens 20 MB Platz auf Festplatte
MS Windows 98/2000/NT/XP/Vista

Mit dem S/L Calibration Workshop erhält der Anwender eine Auswahl bewährter multivariater Techniken für die spektroskopische Analytik. Fertige Applikationen werden hier konfiguriert und stehen dann für die Berechnung von qualitativen oder quantitativen Eigenschaften unbekannter Proben im S/L Predictor zur Verfügung. Alle Spektren, Referenzdaten und Modelle in einem Projekt können übersichtlich in einer einzigen Datenbankdatei verwaltet werden, die zugleich die gemeinsame Datenbasis aller S/L-Module bildet.

Funktionen des S/L Calibration Workshop

Bewährte multivariate Techniken

Methoden der quantitativen Faktoranalyse:

- Principal Component Regression (PCR)
- Partial Least Squares Regression (PLSR)

Multiple lineare Regression (MLR) im Wellenlängenraum:

- Step-up Search (step-up/step-back-Methode)
- Combination Search (vollständige Permutationsmethode)

Die freie Kombinierbarkeit von MLR- und Faktormodellen mit ihren spezifisch angepassten Ausreißer-Diagnosen ermöglicht für jede einzelne Messgröße optimierte Ergebnisse.

Methoden der qualitativen Faktoranalyse (Principal Component Analysis PCA):

- Library Model (PCA-Diskriminanzanalyse von Gruppen)
- Cluster Model (PCA-Diskriminanzanalyse von Einzelspektren)

Datenaustausch

- JCAMP (*.dx, *.jdx)
- GRAMS Multifiles (*.spc)
- Unscrambler (*.una, *.uns)
- Sesame (*.spf)
- Binärfiles (*.dat)

Datenvorbehandlung der Spektren

- Extinktion (Absorbance)
- Gleitender Mittelwert (Smoothing)
- 1. Ableitung (First Derivative, zwei Varianten)
- 2. Ableitung (Second Derivative, zwei Varianten)
- (0,1)-Normierung (Normalization)
- Differenznormierung (2 Wavelength Normalization)
- Ganzkorn-Normierung (Whole Grain, Spezialfall der Differenznormierung für Getreide)
- Standard Normal Variate (SNV)

Alle Algorithmen sind frei kombinierbar.

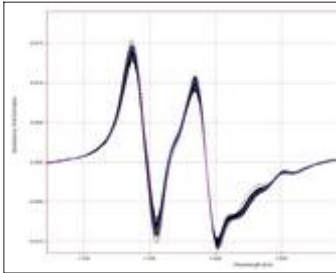


Fig. 1:
CH-Banden (2. Oberton) einer Spektrenserie von Kohlenwasserstoff-Gemischen, die mit der 1. Ableitung der Extinktionswerte transformiert wurde.

Filterwerkzeuge

- Spektrenauswahl nach Extinktionswerten bei einer frei wählbaren Wellenlänge
- Spektrenauswahl nach Referenzwerten der zugeordneten Proben
- Ausfiltern von Spektren nach selektiven Ausreißer-Kriterien
- Leistungsfähige Suchfilter für die Datenbankeinträge

Graphikhilfsmittel

Diverse Spektren-, Scatter- und Histogramm-Plots zur Visualisierung und Bewertung von Messdaten und Modellen.

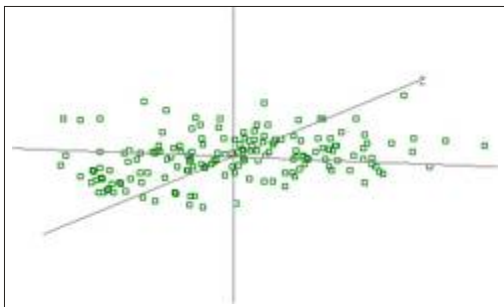
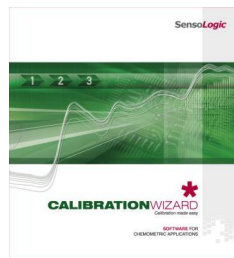


Fig. 2:
Der Score Plot einer Spektrenserie kann zur Identifizierung möglicher Untergruppen oder einzelner Ausreißer dienen.

SL Calibration Wizard (verfügbar ab Mitte 2009)

Schnelle und einfache Modellerstellung für quantitative Analyse schrittweise geführt und weitgehend automatisierbar



Inhalt:
Software S/L Calibration Wizard
Sprache: Englisch
1 CD-ROM
1 Software-Handbuch
(Englisch)

PC System-Anforderungen:
mindestens 1 GB RAM
Bildschirmauflösung mindestens
1024x768
MS Windows 2000(.NET)/XP/Vista

Der S/L Calibration Wizard ist ein echtes Produktivitäts-Tool, mit dem in Ergänzung zum S/L Calibration Workshop mehrere quantitative Kalibrationsmodelle in einem schrittweise geführten Arbeitsprozess parallel erstellt werden. Durch übersichtliche Bedienung, innovative Funktionen und skalierbare Automatisierung ist das Programm für Neueinsteiger und erfahrene Spezialisten gleichermaßen nützlich.

Arbeitsschritte des S/L Calibration Wizard

1. Auswahl der Arbeitsserie und der zu kalibrierenden Probeneigenschaften
2. Reservierung von Testdatensätzen und Auswahl der Kalibrationsdatensätze
3. Festlegung der Transformationen zur Spektrenvorbehandlung
4. Konfigurieren der Regressionsmodelle
5. Berechnung aller Modelle
6. Anzeige aller Kalibrationsresultate
7. Konfigurieren der Prediction-Tests
8. Anzeige aller Testresultate
9. Validierung ausgewählter Modelle
10. Ergebnisübersicht



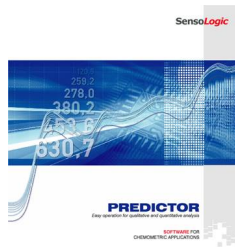
Fig. 3: Der S/L Calibration Wizard zeigt übersichtlich alle Informationen und Werkzeuge, die zum jeweiligen Arbeitsschritt gehören.

Funktionen des S/L Calibration Wizard

- Auswahl der Datenvorbehandlung von Spektren anhand von Varianz- und Kovarianz-analytischen Kriterien
- Einführung der Detrend-Vorbehandlung als Polynomregression
- Multivariate Modellierung mit PLS-Regression und MLR Combination Search
- Signifikanztest zum Vergleich alternativer Modelle
- Automatische Bearbeitung selektiv konfigurierbar für einzelne Wizard-Schritte
- Automatische Ausreißer-Entfernung
- Prediction mit Auswertung der Messunsicherheit
- Signifikanztests für Bias und Skew
- User-Verwaltung mit Speicherung von spezifischen Vorzugs-Einstellungen
- Mehrsprachige Bedienung (Deutsch, Englisch)

S/L Predictor 1.3

Flexibel anpassbarer Messplatz für die tägliche Routine-Analytik in Labor oder Produktion



Inhalt:
Software S/L Predictor
Sprachen: Deutsch, Englisch
1 CD-ROM
1 Software Handbuch
(Deutsch, Englisch)

PC System-Anforderungen:
Intel- oder AMD-Prozessor
(empfohlen > 1 GHz)
mindestens 256 MB RAM
mindestens 20 MB Platz auf
Festplatte
MS Windows 98/2000/NT/XP

Mit dem S/L Predictor erhält der Anwender eine einheitliche Bedienoberfläche für die Aufnahme von Spektren mit Geräten verschiedener Hersteller und die analytische Auswertung mit chemometrischen Modellen, die mit dem S/L Calibration Workshop erstellt wurden. Mit wenigen Konfigurationseingaben vorab wird das Programm auf minimalen Bedienungsaufwand während der Messreihe sowie die bevorzugte Datenspeicherung und Ergebnisausgabe eingerichtet.

Funktionen des S/L Predictor

Konfigurierbarkeit des Arbeitsplatzes

- Spektrometer verschiedener Hersteller sind unter Verwendung vollständig integrierter Originaltreiber eingebunden.
- Für jeden Gerätetyp sind individuell die jeweils zutreffenden Parameter für die Spektrenmessung und ggf. Probenpräsentation (z.B. Drehteller) einstellbar.
- Die Ausgabeformate für die Messergebnisse über Bildschirm, Drucker oder Dateiformate können modular kombiniert werden.

Hauptbildschirm während des Messbetriebs

Der Bediener erhält eine klar strukturierte Information mit dem Spektrum der aktuellen Probe und je nach gewählter Applikation - den qualitativen oder quantitativen Analyseergebnissen.

Wird bei der qualitativen Analyse eine Probe nicht positiv identifiziert, gibt das Programm eine Rangliste der ähnlichsten in der Bibliothek vorhandenen Spezies aus.

Bei quantitativen Methoden kann optional auch zu jedem Ergebnis die individuelle Messunsicherheit angegeben werden.

Parametrierung des Messbetriebs

- Optionale Eingabe von Referenz-Analysenwerten gleich bei der Spektrenaufnahme
- Spektrenaufnahme mit oder ohne Abspeichern direkt in der SL-Datenbankserie
- Spektrenaufnahme allein oder mit anschließender qualitativer bzw. quantitativer chemometrischer Analyse
- Diverse Scan-Optionen wie z.B. Mittelung von Wiederholmessungen und Darstellung der Einzelspektren

Betriebssicherheit

- User-Verwaltung mit zwei Zugriffs-Ebenen (Administrator und User)
- Mehrsprachige Bedienungsführung (Deutsch und Englisch)

SZ Utilities 2.0

Zusatzprogramme für Kalibrationsvorbereitung und Datenhandling



Inhalt:
Software SZ Utilities
Sprache: Englisch
1 CD-ROM
1 Software Handbuch
(Deutsch, Englisch)

PC System-Anforderungen:
Intel- oder AMD-Prozessor
(empfohlen > 1 GHz)
mindestens 256 MB RAM
mindestens 20 MB Platz auf Festplatte
MS Windows 98/2000/NT/XP

Ergänzend zu den Importmöglichkeiten des SZ Calibration Workshop stehen in den SZ Utilities spezielle Werkzeuge für den Datei-Import in die Datenbank und die Konvertierung in das international gebräuchliche Austauschformat JCAMP zur Verfügung. Weitere Hilfsmittel dienen der Spektren-Auswahl (Subset Selection) und Konvertierung (Wavelength Range Conversion).

Der Database Viewer bietet einen raschen Überblick über alle Einträge einer Projekt-Datenbankdatei *.CPF (Chemometric Project File) und ist daher für Sortier- und Archivierungsarbeiten besonders nützlich.

Database Viewer

Schnelle Übersicht über den Inhalt einer CPF-Projektdatei mit Explorer-Struktur

- Proben mit Referenzdaten
- Spektren, Serien und Bibliotheken
- Transformationen
- Kalibrationen, Methoden und Applikationen

Wavelength Range Conversion

Anpassung von Spektrenserien an andere Spektren-Abszissen:

- Beschneidung des Spektralbereichs
- Interpolation auf andere Inkremente oder diskrete Wellenlängen
- Umrechnung zwischen Wellenlängen- und Wellenzahl-Einheiten

Subset Selection

Auswahl einer repräsentativen Teilmenge von Spektren aus einer vorhandenen Serie

- nach Signifikanz (Gauss-Jordan-Verfahren)
- nach dem Zufallsprinzip

SPC File Info, SPC File Import und ISI ASCII File Import

- Anzeigen der Header-Informationen einer SPC-Datei
- Batch-Import von mehreren GRAMS SPC-Singlefiles (optional mit zugeordneten Referenzwerten aus einer Excel-Tabelle) in die CPF-Datenbankdatei
- Import eines GRAMS SPC-Multifiles in die CPF-Datei
- Import einer ASCII-Datei, die mit der WinISI-Software (oder älteren Produkten von InfraSoft International) erzeugt wurde, in die CPF-Datei

JCAMP Single-, CSV Single- und JCM Multifiles

können mit den jeweiligen Konvertierungsprogrammen in das international genormte JCAMP Multifile-Format gebracht werden, um sie zur Weiterverarbeitung in dafür eingerichtete andere Anwendungen (z.B. SZ Calibration Workshop) transferieren zu können.

SZ Mini Soft Keyboard

Diese als eigenständige Anwendung installierbare vereinfachte Bildschirmtastatur mit großen Schaltflächen erleichtert die Bedienung von Geräten mit Touchscreen.

S/L Application Development Kit 2.3

Vielseitige Funktionsbibliotheken für Ihre eigene Software



Inhalt:

Software S/L Application Development Kit je nach Lizenztyp
1 CD-ROM

PC System-Anforderungen:
Intel- oder AMD-Prozessor
(empfohlen > 1 GHz)
MS Windows 98/2000/NT/XP/Vista

Das S/L Application Development Kit besteht aus einer Anzahl von Funktionsbibliotheken (*.dll), mit denen eine neue Software-Anwendung in die S/L-Plattform integriert werden kann.

Für den Software-Entwickler ist eine Developer License erhältlich, die zu den einzelnen Bibliotheken PDF-Dokumente in englischer Sprache sowie ein Beispielprogramm in Visual Basic beinhaltet. Eine entsprechende Runtime License für das Zielsystem kann wahlweise auch als Teillizenz erworben werden, wenn die Anwendung nur quantitative oder nur qualitative Methoden verwendet.

Funktionen des S/L Application Development Kit

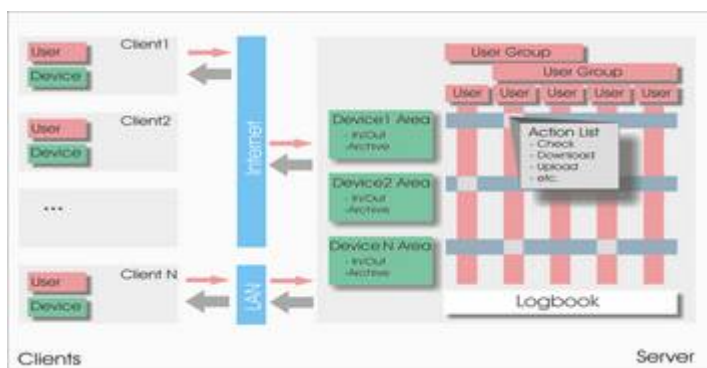
- Quantitative Prediction mit MLR- und Faktor-Regressions-Modellen sowie der zugehörigen Ausreißer-Diagnostik
- Qualitative Prediction mit PCA Library- und Cluster-Modellen
- Direkter Schreib- und Lesezugriff auf Spektrenserien und andere Datenbankeinträge
- Spezialfunktionen zur Standardisierung von Spektrometern
- Alle Algorithmen des S/L Calibration Workshop und S/L Calibration Wizard zur Spektrenrennvorbereitung
- Zusatzfunktionen zur Einbindung in Visual Basic und LabView-Anwendungen

S/L Calibration Network

Kalibrationsnetzwerk für die spektroskopische Analytik

Leistungsmerkmale:

- Datentransfer über LAN oder Internet
- User- und Zugangsverwaltung
- Übertragung von Spektren und Referenzdaten
- Übertragung von Kalibrationsmodellen
- Skalierbar für unterschiedliche Netze
- Integration von Geräten und Software verschiedener Hersteller möglich



Auf Anfrage schlagen wir Ihnen gern eine spezielle Lösung für Ihre Organisation vor.



Kalibrationsentwicklung

Auf Wunsch übernehmen wir im Kundenauftrag die Entwicklung einzelner chemometrischer Kalibrationen, die langfristige Betreuung für bestimmte analytische Methoden bis hin zur kompletten Kalibrationslogistik für vernetzte Arbeitsplätze.

Weiterführende Informationen finden Sie in unserem Infoblatt zu Schulungen und Kalibrationservice sowie in der Produktbeschreibung unseres S/L Calibration Network.

Partner

Um unseren Kunden einen problemlosen Betrieb mit den S/L-Produkten zu ermöglichen, arbeitet Senso *Logic* eng mit den Herstellern von Spektralphotometern zusammen, die uns Original-Gerätetreiber zur Verfügung stellen und/oder das S/L Application Development Kit benutzen. Auf Anfrage erhalten Sie eine aktuelle Liste der Hersteller- und Vertriebsfirmen, die eine Verwendung der S/L-Plattform in Verbindung mit ihren Produkten unterstützen. Da weitere Treiber in Vorbereitung sind, sind wir gern bereit, mit Ihnen über die Implementierungschancen des von Ihnen bevorzugten Gerätetyps zu sprechen.

Schulungen

Senso *Logic* bietet Gruppen- und Firmenseminare zum effizienten Arbeiten mit allen S/L-Produkten sowie zu ihren spektroskopischen und chemometrischen Grundlagen an. Details entnehmen Sie bitte unserem gesonderten Infoblatt zu Schulungen und Kalibrationservice. Die aktuellen Termine veröffentlichen wir regelmäßig auch im Internet (www.sensologic.de).

Preisliste

Bitte fordern Sie unsere aktuelle Preisliste für die Module der S/L-Produktfamilie unter info@sensologic.com (Betreff: S/L-Preisliste) an.

Senso *Logic* GmbH

Hummelsbütteler Steindamm 78 A
D-22851 Norderstedt
Telefon: +49 (0)40 / 52 95 67 - 0
Fax: +49 (0)40 / 52 95 67 - 99

www.sensologic.com

e-mail: info@sensologic.com